

## A bírálóbizottság értékelése

Ferenczy György nemzetközileg is figyelemre méltó eredményeket ért el a számítógépes kémiai modellezés területén. MTA doktori munkájának célja az volt, hogy a korábbiaknál jobb, új módszereket fejlesszen ki a molekuláris kölcsönhatásokat számítógépes elemzéséhez, valamint e módszerek teljesítőképességének és pontosságának ellenőrzéséhez. A számításokkal nyert eredményeket a kísérleti adatokkal szoros összhangban értelmezte. Az elvégzett számítások olyan molekuláris szintű sajátosságok feltárására nyújtanak lehetőséget, amelyek kísérleti módszerekkel közvetlenül nem, vagy csak igen nagy költségekkel tanulmányozhatók.

Ferenczy György MTA doktori disszertációjában összegzett főbb eredmények a következők:

- multipólusokból származtatott töltések elvét továbbfejlesztve effektív multipólusok meghatározásával molekuláris rendszerek töltéseloszlásának és elektrosztatikus kölcsönhatásának leírására alkalmas új módszert dolgozott ki,
- a kvantummechanikai/molekula mechanikai (QM/MM) módszerek esetében az alrendszerek elválasztására több új módszert fejlesztett ki, s megmutatta, hogy az elektrosztatikus potenciál hatékonyan leírható QM alrendszerben effektív töltések alkalmazásával,
- a ligandumok fehérjéhez kötődésekor fellépő kölcsönhatásokat elemezve felismerte, hogy néhány atomos molekulák esetén a kötődésben a kötődési entalpia mutatkozik dominánsnak, a molekulák méretének növekedésével viszont a kötődési szabadentalpia nyereség növekedése döntően entrópikus eredetű,
- e megállapításokból azt a következtetést vonta le, hogy az optimálás folyamán a maximális entalpikus kötődés elérésére célszerű törekedni, továbbá javaslatot tett a vegyület-optimalizálás stratégiájának szempontrendszerére,
- méret-független entalpikus hatékonyság (SIHE) indexet vezetett be, amelynek maximális értéke a molekula mérettől függetlenül 1 körüli, így alkalmas a vegyületek farmakokinetikai tulajdonságainak kölcsönhatási entalpiától függő vizsgálatára.

A bírálóbizottság a jelölt valamennyi tézisét egyöntetűen elfogadta, s az azokban lefektetett új tudományos eredményeket eredetinek és értékesnek ítélte.